



TITLE:

Classical Reduction of Quantum Master Equations as Similarity Transformation(Abstract_要旨)

AUTHOR(S):

Kamiya, Norikazu

CITATION:

Kamiya, Norikazu. Classical Reduction of Quantum Master Equations as Similarity Transformation. 京都大学, 2015, 博士(理学)

ISSUE DATE:

2015-03-23

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k18776>

RIGHT:

学位規則第9条第2項により要約公開; 許諾条件により本文は2018-09-01に公開

(続紙 1)

京都大学	博 士 (理 学)	氏名	紙谷 典和
論文題目	Classical Reduction of Quantum Master Equations as Similarity Transformation (相似変換としての量子マスター方程式の古典化)		
(論文内容の要旨)			
<p>輸送現象などの非平衡過程では、孤立した系を扱うのではなく熱浴や粒子浴などの環境からの影響を考慮しなければならない。環境からの影響を受けながら量子的な時間発展を行う系を量子開放系と呼ぶ。近年のナノテクノロジーやナノデバイスの発展により、量子開放系の重要性はますます高まっている。</p> <p>量子開放系の理論的な取り扱いには、着目する系の密度行列に対するマスター方程式を用いることが多い。マスター方程式は、系と環境のカップリングに対する2次の摂動を行い、環境は平衡状態にあると仮定してその自由度を消去することで、全系に対するフォン・ノイマン方程式から形式的に導くことができる。Redfield方程式と呼ばれるこの方程式は、密度行列の確率的解釈のために必要な正值性などの条件を満たしていない。そのため、さらに回転波近似(RWA)と呼ばれる近似を行うことで、正值性を満たす方程式にして用いることが多い。回転波近似を行って得られるマスター方程式は、密度行列の対角成分と非対角部分が分離するので、対角部分だけを見れば古典マスター方程式と見ることも可能である。</p> <p>回転波近似は量子光学の分野などでは実験と一致する良い結果を導くが、エネルギー輸送を扱うには不適當であるとされてきた。それは、RWAによって得られる定常状態の密度行列が対角成分しか持たないのに対し、熱流の演算子は非対角なので、期待値が常に0になってしまうからである。系と環境の間のエネルギーのやりとりはRWAでも記述できるので、環境からのエネルギー流があるにもかかわらず内部を流れる熱流がないという非物理的な結果になってしまう。</p> <p>紙谷は、量子マスター方程式を古典化して物理量の期待値を求める一連の過程を見直し、相似変換に基づく定式化を行うことでこの問題を解決した。RWAのマスター方程式は、射影演算子を用いる方法でも導出することができるが、紙谷はまずこの手続きが近似的な相似変換としても書けることを導いた。射影演算子法を含む従来の方法では、密度行列の近似解を得ることが主眼で、物理量の期待値はその近似解を用いて通常の手続きでなされる。しかし、相似変換という見方をする場合、物理量の期待値は物理量の演算子と密度行列の積のトレースで与えられるので、密度行列を変換するならば物理量もそれに応じて変換しなければならないという結論が導かれる。以上が2章の内容である。紙谷は、3章において、この手法を具体的な系に適用した。少数自由度の系であれば、対角化によって量子マスター方程式を解くことができるので、熱流の期待値について、厳密解と紙谷の方法による結果とを比較することができた。その結果、熱流演算子に対して変換を施すことで、カップリングの1次までで厳密解の値を再現することができた。</p> <p>第4章では量子輸送効率の問題が議論される。光合成では、葉緑体から反応中心まで励起子によるエネルギー輸送が行われる。このとき、励起エネルギーが反応中心まで届く割合を輸送効率という。この励起子による輸送では、長く続く量子コヒーレンスが観測されており、量子系としての扱いが必要である。紙谷は、量子効率の計算では古典近似が正確な値を与えることを導いた。これは、古典近似が正当化されない領域でも成立するので、古典近似の有効性を拡大する結果である。また、環境の効果で輸送効率が上がる「環境に支援された量子輸送」についても統一的な見方を与えた。</p>			

(続紙 2)

(論文審査の結果の要旨)

量子マスター方程式に対する回転波近似は、速いモードを消去して遅いモードを残すという統計物理学でよく行われる近似の一つであるが、エネルギー輸送問題に適用しようとする内部の熱流が消えてしまうという困難があることがよく知られている。ただし、系と環境とのエネルギーのやりとりは計算できるので、回転波近似を輸送問題に適用する場合には、それだけで満足するしかなかった。本論文は、この困難に対し果敢に挑戦してそれに対する解答を与え、新たな計算法を提唱するものである。紙谷はまず量子マスター方程式の古典化の導出法を詳細に検討し、相似変換という見方で統一的に表せることを示した。ここまでであれば、従来から知られている近似に別の導出法を与えたにすぎないが、相似変換の影響が物理量の期待値の計算にも及ぶということに気づいたのが大きな発見である。つまり、物理量の期待値の計算式の中で相似変換を適用すれば、物理量の演算子自体も相似変換されねばならないということが導かれる。これは量子マスター方程式だけを考えていたのでは出てこない視点であり、この研究を独創的なものにしている。第3章ではこの新しい計算法が確かに有効であるということを簡単な例で示している。ただし、この例は説明のために作ったものであり、新しい計算法の有用性を示すためには、より現実的な系への応用が期待されるところであるが、それは将来の課題として残されている。

第4章で述べられている結果は、あるクラスの物理量の時間積分値が量子マスター方程式と古典マスター方程式で正確に同じ値になるというものである。これは、古典近似が良くないとされるようなパラメータ領域でも成立する非自明な関係であって大変興味深く、光合成に代表されるような環境に支援された量子輸送の問題を議論する場合の拠り所になるものと考えられる。環境に支援された量子輸送とは、環境によるゆらぎが系の位相を乱すことで輸送が促進されるというもので、非一様系に対してはアンダーソン局在が壊れることで説明されるが、一様系でも起こることがわかってきている。本論文の4.3節では、簡単な例を用いて古典マスター方程式の範囲でこの現象の解析を行い、一様系で環境に支援された輸送が起こることが示されている。この解析が環境に支援された輸送の本質を突いた解析になっているかどうかは議論の余地があるが、新しい解析の可能性を示したことに価値があるといえる。

このように本論文の内容は大変独創的なものであり高く評価される。また、第1章では、背景となる量子マスター方程式の性質と熱伝導の問題に応用するときの問題点が解説され、それを解決して新しい方法を示すという本論文の目的が明確に述べられており、自らの研究の位置づけがしっかりとされている。

よって、本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。また、平成27年1月14日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。なお、本論文は、京都大学学位規程第14条第2項に該当するものと判断し、公表に際しては、(投稿論文が出版されるまでの間)当該論文の全文に代えてその内容を要約したものとすることを認める。

要旨公表可能日： 年 月 日以降